

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВЕРХНЕГО КРИТИЧЕСКОГО ПОЛЯ В НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С ПРИТЯЖЕНИЕМ

Э. З. Кучинский^{a*}, Н. А. Кулеева^a, М. В. Садовский^{a,b**}

^a Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук
620016, Екатеринбург, Россия

^b Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 30 августа 2017 г.

Исследовано влияние разупорядочения на температурное поведение верхнего критического поля в модели Хаббарда с притяжением в рамках обобщенного DMFT+ Σ -подхода. Рассмотрена широкая область изменения потенциала притяжения U от предела слабой связи, где сверхпроводимость описывается моделью Бардина–Купера–Шриффера (БКШ), к пределу очень сильной связи, где переход в сверхпроводящее состояние связан с бозе-эйнштейновской конденсацией (БЭК) компактных куперовских пар, образующихся при температуре существенно выше температуры перехода в сверхпроводящее состояние, а также широкий интервал разупорядочения — от слабого до сильного, когда система находится в окрестности перехода Андерсона. Рост силы связи приводит к быстрому росту $H_{c2}(T)$, особенно в низкотемпературной области. В пределе БЭК и в области кроссовера БКШ–БЭК зависимость $H_{c2}(T)$ становится практически линейной. Разупорядочение также приводит к росту $H_{c2}(T)$. В БКШ-пределе слабой связи с усилением беспорядка растут как наклон верхнего критического поля вблизи точки перехода, так и $H_{c2}(T)$ в низкотемпературной области. В пределе сильного беспорядка в окрестности перехода Андерсона локализационные поправки приводят к дополнительному увеличению $H_{c2}(T)$ в низкотемпературной области и кривая $H_{c2}(T)$ становится вогнутой. В области кроссовера БКШ–БЭК и в пределе БЭК разупорядочение достаточно слабо влияет на наклон верхнего критического поля вблизи T_c . Однако в низкотемпературной области $H_{c2}(T)$ может существенно расти с увеличением беспорядка в окрестности перехода Андерсона, где за счет локализационных поправок заметно увеличивается $H_{c2}(T=0)$ и кривая $H_{c2}(T)$ становится вогнутой.

DOI: 10.7868/S0044451017120173

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования влияния разупорядочения на сверхпроводимость имеют достаточно долгую историю. В пионерских работах Абрикосова и Горькова [1–4] рассматривался предел слабого беспорядка ($p_F l \gg 1$, где p_F — импульс Ферми и l — длина свободного пробега) и сверхпроводимости со слабой связью, хорошо описываемой теорией БКШ. Известная «теорема Андерсона» о критической температуре T_c сверхпроводников с «нормальным» (немагнитным) беспорядком [5, 6] также обычно относится к этому пределу.

Обобщение теории «грязных» сверхпроводников на случай достаточно сильного беспорядка ($p_F l \sim 1$) (и далее, вплоть до области перехода Андерсона) было выполнено в работах [7–10], где сверхпроводимость также рассматривалась в пределе слабой связи.

Наиболее ярко влияние разупорядочения проявляется в поведении верхнего критического поля в теории грязных сверхпроводников с ростом беспорядка. С увеличением беспорядка растут как наклон температурной зависимости верхнего критического поля в T_c [6], так и $H_{c2}(T)$ во всей температурной области [11]. Эффекты андерсоновской локализации в пределе достаточно сильного беспорядка также наиболее ярко проявляют себя в температурной зависимости верхнего критического поля.

* E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

** E-mail: sadovski@iep.uran.ru

Непосредственно в точке андерсоновского перехода металл–диэлектрик эффекты локализации приводят к резкому возрастанию H_{c2} в низкотемпературной области и температурная зависимость $H_{c2}(T)$ качественно отличается от зависимости Вертхамера, Хельфанда, Хоэнберга (WHH) [11], характерной для теории грязных сверхпроводников — кривая $H_{c2}(T)$ становится вогнутой, т. е. приобретает положительную кривизну [7–9].

Проблема обобщения теории БКШ в область очень сильной связи известна уже достаточно давно. Существенный прогресс в этом направлении был связан с работой Нозьера и Шмитт-Ринка [12], которые предложили эффективный метод для исследования кроссовера от поведения типа БКШ в области слабой связи к бозе-эйнштейновской конденсации (БЭК) в области сильной связи. В то же время, проблема сверхпроводимости неупорядоченных систем в пределе сильной связи и в области кроссовера БКШ–БЭК исследована достаточно слабо.

Одной из наиболее простых моделей, в которых можно исследовать кроссовер БКШ–БЭК, является модель Хаббарда с притяжением. Наиболее успешным подходом к исследованию модели Хаббарда как для описания сильно коррелированных систем в случае отталкивательного взаимодействия, так и для исследования кроссовера БКШ–БЭК в случае притяжения, является теория динамического среднего поля (DMFT) [13–15].

В последние годы нами развивался обобщенный подход DMFT+ Σ к модели Хаббарда [16–21], который оказался очень удобным для исследования влияния различных внешних (по отношению к учитываемому в рамках DMFT) взаимодействий. В частности, этот подход хорошо применим и для анализа двухчастичных свойств, таких как оптическая (динамическая) проводимость [20, 22].

В работе [23] мы использовали этот подход для анализа одночастичных свойств нормальной фазы и оптической проводимости в модели Хаббарда с притяжением. В дальнейшем метод DMFT+ Σ был использован нами в работе [24] для исследования влияния беспорядка на температуру сверхпроводящего перехода, вычисляющуюся в рамках подхода Нозьера–Шмитт-Ринка. В частности, в этой работе для случая полуэллиптической модели затравочной плотности состояний, адекватной для описания трехмерных систем, мы численно продемонстрировали выполнение обобщенной теоремы Андерсона и показали, что влияние беспорядка на критическую температуру (во всей области изменения параметров взаимодействия) связано лишь с общим ушире-

нием затравочной зоны (плотности состояний) беспорядком. В приближении DMFT+ Σ аналитическое доказательство такой универсальности влияния беспорядка на одночастичные характеристики и температуру сверхпроводящего перехода для случая полуэллиптической зоны было получено нами в работе [25].

Начиная с классической работы Горькова [3], хорошо известно, что разложение Гинзбурга–Ландау играет фундаментальную роль в теории грязных сверхпроводников, позволяя эффективно исследовать поведение различных физических величин вблизи критической температуры в зависимости от степени беспорядка [6]. Обобщение этой теории (для сверхпроводников со слабой связью) в область сильного беспорядка (вплоть до андерсоновского перехода металл–диэлектрик) было проведено в работах [7–9].

В работах [26–28] с помощью комбинации приближений Нозьера–Шмитт-Ринка и DMFT+ Σ для модели Хаббарда с притяжением был дан микроскопический вывод коэффициентов разложения Гинзбурга–Ландау с учетом неупорядоченности системы, что позволило обобщить теорию Гинзбурга–Ландау на область кроссовера БКШ–БЭК и предела БЭК очень сильной связи с учетом различной степени разупорядочения. В частности, в работе [28] с использованием обобщения самосогласованной теории локализации этот подход был обобщен в том числе и на область сильного беспорядка, когда существенны эффекты от локализации Андерсона. Было показано, что в пределе слабой связи наклон кривой $H_{c2}(T)$ при $T = T_c$ возрастает с разупорядочением в области слабого беспорядка в соответствии с теорией грязных сверхпроводников, а в пределе сильного беспорядка локализационные эффекты приводят к дополнительному возрастанию наклона верхнего критического поля. В области же кроссовера БКШ–БЭК и в пределе БЭК наклон $H_{c2}(T)$ вблизи T_c лишь незначительно растет с увеличением беспорядка, а учет эффектов андерсоновской локализации оказывается достаточно несущественным.

В данной работе с использованием комбинации приближений Нозьера–Шмитт-Ринка и DMFT+ Σ в модели Хаббарда с притяжением мы проанализируем влияние разупорядочения на температурную зависимость $H_{c2}(T)$ в широкой области значений силы притяжения U , включающей область кроссовера БКШ–БЭК, а также широкую область величины беспорядка, вплоть до окрестности перехода Андерсона.

2. МОДЕЛЬ ХАББАРДА В РАМКАХ ПОДХОДА DMFT+ Σ В ПРИБЛИЖЕНИИ НОЗЬЕРА – ШМИТТ-РИНКА

Мы рассматриваем неупорядоченную немагнитную модель Андерсона–Хаббарда с притяжением, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} - U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где $t > 0$ — амплитуда перескока между ближайшими соседями, U — хаббардовское притяжение на узле, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ — оператор числа электронов на узле, $a_{i\sigma}$ ($a_{i\sigma}^\dagger$) — оператор уничтожения (рождения) электрона со спином σ , локальные энергии ϵ_i полагаются независимыми случайными величинами на разных узлах решетки. Для справедливости стандартной «примесной» диаграммной техники [29, 30] мы предполагаем гауссовское распределение для энергетических уровней ϵ_i :

$$\mathcal{P}(\epsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \exp\left(-\frac{\epsilon_i^2}{2\Delta^2}\right) \quad (2)$$

Ширина распределения Δ служит мерой силы беспорядка, а гауссовское случайное поле энергетических уровней (независимое на различных узлах решетки — корреляция типа «белого шума») вызывает «примесное» рассеяние, которое рассматривается в рамках стандартного подхода, основанного на вычислении усредненных функций Грина [30].

Обобщенный подход DMFT+ Σ [16–19] дополняет стандартную теорию динамического среднего поля (DMFT) [13–15] учетом добавочной «внешней» собственно-энергетической части (СЭЧ) $\Sigma_{\mathbf{p}}(\epsilon)$ (в общем случае зависящей от импульса), являющейся следствием любого вида взаимодействия за пределами DMFT, и дает эффективный метод вычисления как одночастичных, так и двухчастичных свойств [20, 22]. При этом полностью сохраняется стандартная система самосогласованных уравнений DMFT [13–15], но на каждом шаге итерационной схемы DMFT внешняя СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\epsilon)$ пересчитывается заново с помощью некоторой приближенной схемы, соответствующей виду добавочного взаимодействия, а локальная функция Грина DMFT также «одевается» $\Sigma_{\mathbf{p}}(\epsilon)$ на каждом шаге стандартной DMFT-процедуры.

В рассматриваемой здесь задаче о рассеянии на беспорядке [20, 21] для внешней СЭЧ, входящей в DMFT+ Σ -цикл, мы используем простейшее (самосогласованное борновское) приближение, пренебрегающее «пересекающимися» диаграммами для при-

месного рассеяния. Такая внешняя СЭЧ остается не зависящей от импульса (локальной).

В данной работе, как и в предыдущих наших работах, для решения эффективной однопримесной модели Андерсона в DMFT использовался чрезвычайно эффективный метод численной ренормгруппы (NRG) [31].

В дальнейшем мы принимаем модель «затравочной» зоны с полуэллиптической плотностью состояний (на элементарную ячейку с параметром решетки a и один спин), которая является неплохим приближением для трехмерного случая:

$$N_0(\epsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \epsilon^2}, \quad (3)$$

где D определяет полуширину зоны проводимости.

В работе [25] мы показали, что в DMFT+ Σ -подходе в модели с полуэллиптической плотностью состояний все влияние беспорядка на одночастичные свойства сводится лишь к уширению зоны беспорядком, т. е. к замене $D \rightarrow D_{eff}$, где D_{eff} — эффективная полуширина затравочной зоны в отсутствие электронных корреляций ($U = 0$), уширенная беспорядком:

$$D_{eff} = D \sqrt{1 + 4 \frac{\Delta^2}{D^2}}. \quad (4)$$

Затравочная (в отсутствие U) плотность состояний, «одетая» беспорядком,

$$\tilde{N}_0(\xi) = \frac{2}{\pi D_{eff}^2} \sqrt{D_{eff}^2 - \xi^2}, \quad (5)$$

остается полуэллиптической и в присутствии беспорядка.

Необходимо отметить, что в других моделях затравочной зоны беспорядок наряду с уширением зоны будет изменять и форму плотности состояний. Поэтому полной универсальности влияния беспорядка на одночастичные свойства, сводящейся к замене $D \rightarrow D_{eff}$, вообще говоря, нет. Однако в интересующем нас, главным образом, пределе сильного беспорядка затравочная зона становится практически полуэллиптической и универсальность восстанавливается [25].

Все расчеты в данной работе, как и в предыдущих, были проведены для достаточно типичного случая четвертичного заполнения зоны (число электронов на узел решетки $n = 0.5$).

При рассмотрении сверхпроводимости в широком интервале изменений спаривательного взаимодействия U , следуя работам [23, 25], мы используем

приближение Нозьера–Шмитт-Ринка [12], что позволяет качественно правильно (хотя и приближенно) описать область кроссовера БКШ–БЭК. В этом подходе для определения критической температуры T_c используется [25] обычное уравнение БКШ типа

$$1 = \frac{U}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \tilde{N}_0(\varepsilon) \frac{\text{th}((\varepsilon - \mu)/2T_c)}{\varepsilon - \mu}, \quad (6)$$

в котором химический потенциал μ для разных значений U и Δ определяется из DMFT+ Σ -расчетов, т. е. из стандартного уравнения для числа электронов (заполнение зоны), что позволяет найти T_c в широком интервале значений параметров модели, включая область кроссовера БКШ–БЭК и предел сильной связи, а также для различных степеней беспорядка. Это отражает физический смысл приближения Нозьера–Шмитт-Ринка: в области слабой связи температура перехода контролируется уравнением для куперовской неустойчивости (6), тогда как в пределе сильной связи она определяется как температура БЭК, которая контролируется химическим потенциалом.

В работе [25] было показано, что влияние беспорядка на критическую температуру T_c и одночастичные характеристики (например, плотность состояний) в модели с полуэллиптической затравочной плотностью состояний универсально и сводится лишь к изменению эффективной ширины зоны. В области слабой связи температура сверхпроводящего перехода хорошо описывается моделью БКШ, а в области сильной связи критическая температура в основном определяется условием бозе-конденсации куперовских пар и убывает с ростом U как t^2/U , проходя через максимум при $U/2D_{\text{eff}} \sim 1$.

Обзор этих и других результатов, полученных для неупорядоченной модели Хаббарда в DMFT+ Σ -приближении, можно найти в [21].

3. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ВЕРХНЕГО КРИТИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В используемом нами подходе Нозьера–Шмитт-Ринка критическая температура сверхпроводящего перехода определяется совместным решением уравнений для куперовской неустойчивости в куперовском канале частица–частица в приближении слабой связи и уравнения для химического потенциала системы во всем интервале значений хаббардовского взаимодействия в

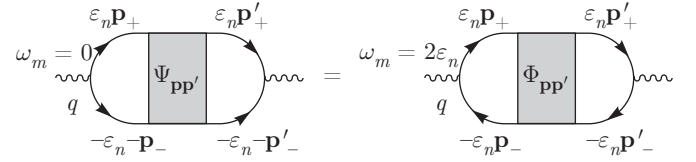


Рис. 1. Равенство петель в куперовском и диффузионном каналах в условиях инвариантности относительно обращения времени

рамках приближения DMFT+ Σ . Обычное условие для куперовской неустойчивости имеет вид

$$1 = -U\chi(\mathbf{q}), \quad (7)$$

где $\chi(\mathbf{q})$ — куперовская восприимчивость, определяемая петлей в куперовском канале, показанной на рис. 1. В присутствии внешнего магнитного поля суммарный импульс $\mathbf{q}$ в куперовском канале приобретает добавку от вектор-потенциала $\mathbf{A}$,

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} - \frac{2e}{c} \mathbf{A}. \quad (8)$$

Поскольку наша модель предполагает изотропный спектр, куперовская восприимчивость $\chi(\mathbf{q})$ зависит от $\mathbf{q}$ лишь через q^2 . Минимальное собственное значение $(\mathbf{q} - (2e/c)\mathbf{A})^2$, отвечающее (орбитальному)¹⁾ верхнему критическому магнитному полю $H = H_{c2}$, есть [32]

$$q_0^2 = 2\pi \frac{H}{\Phi_0}, \quad (9)$$

где $\Phi_0 = ch/2e = \pi\hbar/e$ — квант магнитного потока. Тогда уравнение на $T_c(H)$ или $H_{c2}(T)$ остается прежним:

$$1 = -U\chi(q^2 = q_0^2). \quad (10)$$

При дальнейшем анализе мы будем пренебрегать относительно слабым влиянием магнитного поля на процессы диффузии (неинвариантностью относительно обращения времени), проявляющимся в неравенстве петель в куперовском и диффузионном каналах. Учет такого влияния магнитного поля анализировался в работах [9, 10, 33, 34], где было продемонстрировано, что такой учет даже вблизи андерсоновского перехода металл–диэлектрик лишь незначительно уменьшает величину $H_{c2}(T)$ в низкотемпературной области. В условиях инвариантности относительно обращения времени и в связи с тем,

¹⁾ В этой работе мы не рассматриваем парамагнитный эффект, связанный со спином электронов.

что примесное рассеяние, которым одета двухчастичная функция Грина $\Psi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\varepsilon_n, \mathbf{q})$, является статическим, можно изменить направление всех нижних электронных линий с одновременным изменением знака всех входящих в них импульсов (см. рис. 1). В результате получаем

$$\Psi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\varepsilon_n, \mathbf{q}) = \Phi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\omega_m = 2\varepsilon_n, \mathbf{q}), \quad (11)$$

где ε_n — фермионные мацубаровские частоты, $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{q}/2$, $\Phi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\omega_m = 2\varepsilon_n, \mathbf{q})$ — двухчастичная функция Грина в диффузионном канале, одетая примесями. В результате для куперовской восприимчивости получаем

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{q}) &= -T \sum_{n,\mathbf{p},\mathbf{p}'} \Psi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\varepsilon_n, \mathbf{q}) = \\ &= -T \sum_{n,\mathbf{p},\mathbf{p}'} \Phi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\omega_m = 2\varepsilon_n, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (12)$$

Выполняя стандартную процедуру суммирования по фермионным мацубаровским частотам [29, 30] получаем для куперовской восприимчивости в уравнении (10)

$$\chi(q_0^2) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \operatorname{Im} \Phi^{RA}(\omega = 2\varepsilon, q_0^2) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T}, \quad (13)$$

где

$$\Phi^{RA}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \Phi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{RA}(\omega, \mathbf{q}).$$

Для нахождения петли $\Phi^{RA}(\omega, \mathbf{q})$ в условиях сильного беспорядка (в том числе в области андерсоновской локализации) можно воспользоваться приближенной самосогласованной теорией локализации [30, 35–40]. Тогда эта петля содержит диффузионный полюс следующего вида [20]:

$$\Phi^{RA}(\omega = 2\varepsilon, q_0^2) = -\frac{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}{\omega + iD(\omega)q_0^2}, \quad (14)$$

где

$$\Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) - G^A(-\varepsilon, \mathbf{p}),$$

G^R и G^A — запаздывающая и опережающая функции Грина, а $D(\omega)$ — зависящий от частоты обобщенный коэффициент диффузии. В результате уравнение (10) для $H_{c2}(T)$ принимает вид

$$\begin{aligned} 1 &= -\frac{U}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \operatorname{Im} \left(\frac{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}{2\varepsilon + iD(2\varepsilon)2\pi H_{c2}/\Phi_0} \right) \times \\ &\times \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T}. \end{aligned} \quad (15)$$

Обобщенный коэффициент диффузии в рамках самосогласованной теории локализации [30, 35–40] для рассматриваемой модели находится путем решения следующего уравнения самосогласования [20]:

$$\begin{aligned} D(\omega) &= i \frac{\langle v \rangle^2}{d} \left(\omega - \Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) + \Delta^4 \sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}^2(\varepsilon) \times \right. \\ &\times \left. \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega + iD(\omega)q^2} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $\omega = 2\varepsilon$,

$$\Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) = \Sigma_{imp}^R(\varepsilon) - \Sigma_{imp}^A(-\varepsilon),$$

d — размерность пространства, а средняя скорость $\langle v \rangle$ определяется выражением

$$\langle v \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}, \quad \mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}. \quad (17)$$

С учетом предела применимости диффузионного приближения суммирование по q в (16) должно быть ограничено областью [30, 39]

$$q < k_0 = \min\{l^{-1}, p_F\}, \quad (18)$$

где l — длина свободного пробега за счет упругого рассеяния на беспорядке, а p_F — импульс Ферми.

В пределе слабого беспорядка, когда локализационные поправки малы, куперовская восприимчивость $\chi(\mathbf{q})$ определяется лестничным приближением. В этом приближении куперовская восприимчивость была исследована нами в работе [27]. Перестроим теперь уравнение самосогласования (16), так чтобы в пределе слабого беспорядка воспроизвести результат лестничного приближения. В этом приближении, когда мы пренебрегаем вкладом в неприводимую вершину от «максимально перекрестных» диаграмм, в правой части уравнения самосогласования (16) пропадает последнее слагаемое. Введем теперь зависящий от частоты обобщенный коэффициент диффузии в лестничном приближении:

$$D_0(\omega) = \frac{\langle v \rangle^2}{d} \frac{i}{\omega - \Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega)}. \quad (19)$$

Величину $\langle v \rangle^2/d$, входящую в уравнение самосогласования (16), можно переписать через этот коэффициент диффузии D_0 в лестничном приближении. При этом уравнение самосогласования (16) принимает вид

$$D(\omega = 2\varepsilon) = D_0(\omega = 2\varepsilon) \left(1 + \frac{\Delta^4}{2\varepsilon - \Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega = 2\varepsilon)} \times \sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}^2(\varepsilon) \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2\varepsilon + iD(\omega = 2\varepsilon)q^2} \right)^{-1}. \quad (20)$$

В рамках подхода работы [27] коэффициент диффузии $D_0(\omega = 2\varepsilon)$ в лестничном приближении может быть получен в аналитическом виде. Действительно, в лестничном приближении двухчастичная функция Грина (14) имеет вид

$$\Phi_0^{RA}(\omega = 2\varepsilon, \mathbf{q}) = -\frac{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}{\omega + iD_0(\omega = 2\varepsilon)q^2}. \quad (21)$$

Введем функцию

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon, \mathbf{q} = 0) &\equiv \\ &\equiv \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi_0^{RA}(\omega = 2\varepsilon, \mathbf{q}) - \Phi_0^{RA}(\omega = 2\varepsilon, \mathbf{q} = 0)}{q^2} = \\ &= \frac{i \sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}{\omega^2} D_0(\omega = 2\varepsilon). \end{aligned} \quad (22)$$

Тогда коэффициент диффузии D_0 может быть записан в виде

$$D_0 = \frac{\varphi(\varepsilon, \mathbf{q} = 0)(2\varepsilon)^2}{i \sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}. \quad (23)$$

В работе [27] с использованием точного тождества Уорда в лестничном приближении было показано, что функция $\varphi(\varepsilon, \mathbf{q} = 0)$ может быть записана как

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon, \mathbf{q} = 0)(2\varepsilon)^2 &= \sum_{\mathbf{p}} v_x^2 G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) G^A(-\varepsilon, \mathbf{p}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial^2 \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x^2} (G^R(\varepsilon, \mathbf{p}) + G^A(-\varepsilon, \mathbf{p})), \end{aligned} \quad (24)$$

где $v_x = \partial \varepsilon(\mathbf{p}) / \partial p_x$.

Дальнейшая процедура численных расчетов выглядит следующим образом. По формулам (24), (23) мы находим коэффициент диффузии D_0 в лестничном приближении. С использованием уравнения самосогласования (20) находим обобщенный коэффициент диффузии и из (15) определяем $H_{c2}(T)$.

4. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В уравнение (15) для определения $H_{c2}(T)$ как параметр входит значение химического потенциала, который определяется из условия четвертичного заполнения зоны с помощью DMFT+ Σ -процедуры.

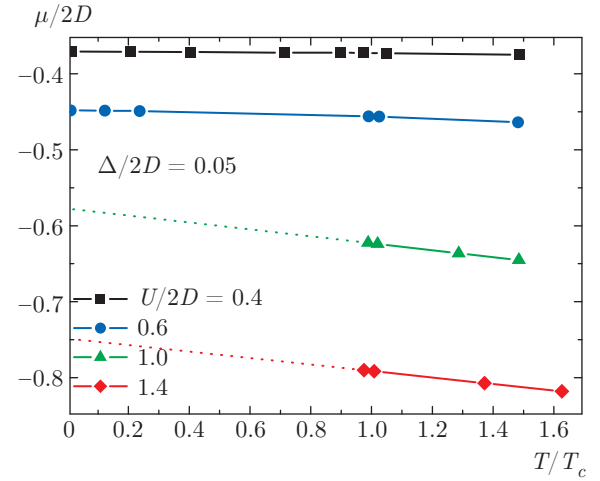


Рис. 2. Температурная зависимость химического потенциала при $\Delta/2D = 0.05$ и различных значениях силы связи

Химический потенциал не только зависит от силы связи, но, вообще говоря, имеет и температурную зависимость, которая оказывается весьма существенной для определения величины $H_{c2}(T)$ в пределе достаточно сильной связи. Используемый нами для решения примесной задачи DMFT алгоритм NRG пренебрегает квантованием электронных уровней в магнитном поле, т.е. влиянием магнитного поля на орбитальное движение электронов и, соответственно, на химический потенциал. В работе [23] мы показали, что для модели Хаббарда с притяжением наша DMFT-процедура оказывается неустойчивой при $T < T_c$, что проявляется в разнице четных и нечетных итераций DMFT. Такая неустойчивость, по-видимому, связана с неустойчивостью нормального состояния при $T < T_c$. В частности, она особенно ярко проявляется в БЭК-пределе сильной связи (для $U/2D \geq 1$), что приводит к невозможности определить величину химического потенциала при $T < T_c$. В пределе же слабой связи количественная разница между результатами четных и нечетных итераций DMFT оказывается очень малой, что позволяет с достаточной точностью находить значения $\mu(T)$ в том числе и при $T < T_c$. На рис. 2 приведена температурная зависимость химического потенциала при различных значениях силы связи. В пределе слабой связи ($U/2D = 0.4, 0.6$) на рис. 2 приведены точки, полученные из DMFT+ Σ -расчетов, в том числе и при $T < T_c$. В пределе сильной связи мы можем найти химический потенциал непосредственно из DMFT+ Σ -процедуры лишь при $T > T_c$, соответствующие точки также приведены на рис. 2. Из этого рисунка следует, что в присутствии вза-

имодействия у химического потенциала появляется линейная зависимость от температуры и именно эта зависимость является для нас существенной. В пределе слабой связи химический потенциал не испытывает никаких существенных особенностей при $T < T_c$, поэтому мы можем предположить, что и в пределе сильной связи для μ сохраняется аналогичная зависимость от температуры, которую можно найти линейной экстраполяцией (пунктирные прямые с $U/2D = 1.0, 1.4$ на рис. 2) из области $T > T_c$. Такая процедура и используется в дальнейших расчетах для области сильной связи.

В пределе слабого беспорядка ($\Delta/2D = 0.05$ на рис. 3а) в области слабой связи ($U/2D = 0.2$) наблюдается температурная зависимость верхнего критического поля аналогичная стандартной зависимости WHN [11] с отрицательной кривизной. Рост силы связи, вообще говоря, приводит к увеличению верхнего критического поля до очень больших величин, существенно превышающих $\Phi_0/2\pi a^2$ (a — постоянная решетки) в области низких температур. При промежуточной силе связи ($U/2D = 0.4, 0.6$) на кривой температурной зависимости $H_{c2}(T)$ возникает слабый максимум при $T/T_c \sim (0.2-0.4)$. Дальнейший рост силы связи приводит к росту верхнего критического поля, при $U/2D = 1$ температурная зависимость $H_{c2}(T)$ становится практически линейной и дальнейший рост силы связи практически не изменяет величины верхнего критического поля во всей температурной области. С ростом беспорядка ($\Delta/2D = 0.11$ на рис. 3б) ситуация остается качественно аналогичной. Рост силы связи в начале приводит к росту H_{c2} во всей области температур. Небольшой максимум $H_{c2}(T)$, наблюдающийся при промежуточной связи ($U/2D = 0.4, 0.6$) и слабом беспорядке ($\Delta/2D = 0.05$), при этом пропадает. В области сильной связи ($U/2D \geq 1$) $H_{c2}(T)$ фактически линейна и очень слабо меняется с изменением силы связи. При достаточно сильном беспорядке ($\Delta/2D = 0.25$) с ростом силы связи верхнее критическое поле также растет во всей температурной области. Этот рост сохраняется вплоть до предела БЭК очень сильной связи ($U/2D = 1.4$), начиная с которого зависимость $H_{c2}(T)$ становится линейной и уже слабо изменяется с ростом силы связи. Для сравнения на рис. 3в (слева) при $U/2D = 0.6$ приведены как данные расчета с использованием самосогласованной теории локализации (темные треугольники и сплошная кривая), так и данные расчета с использованием лестничного приближения по примесному рассеянию (светлые треугольники и пунктирная кривая). Слабое различие этих кривых де-

монстрирует, что поправки от андерсоновской локализации при таком беспорядке ($\Delta/2D = 0.25$) достаточно слабы.

В используемой нами модели в приближении DMFT+ Σ андерсоновский переход металл–диэлектрик происходит при $\Delta/2D = 0.37$ и это значение критического беспорядка не зависит от силы связи (см. [20]). Температурное поведение верхнего критического поля непосредственно в точке перехода Андерсона и в фазе андерсоновского диэлектрика при различных значениях силы связи приведено на рис. 4. На этом рисунке темные символы и сплошные кривые отвечают расчетам с использованием самосогласованной теории локализации, а светлые символы и пунктирные кривые отвечают расчетам с использованием лестничного приближения по примесному рассеянию. В точке перехода Андерсона ($\Delta/2D = 0.37$ на рис. 4а) эффекты андерсоновской локализации в пределе слабой связи очень сильно изменяют температурную зависимость $H_{c2}(T)$. Эффекты локализации во всей области температур увеличивают $H_{c2}(T)$. Однако наибольшее увеличение наблюдается при низких температурах, так что $H_{c2}(T)$ приобретает положительную кривизну, что было впервые продемонстрировано в работах [7, 8]. Увеличение силы связи приводит к росту верхнего критического поля во всей температурной области. Кривые $H_{c2}(T)$ в области промежуточной связи ($U/2D = 0.6, 1$) по-прежнему имеют положительную кривизну. Дальнейший рост силы связи до $U/2D = 1.4$ также увеличивает H_{c2} во всей температурной области. Однако учет локализационных поправок при такой сильной связи существен лишь при низких температурах ($T/T_c < 0.1$). В этой области кривая $H_{c2}(T)$ имеет положительную кривизну, а при остальных же температурах $H_{c2}(T)$ фактически линейна. С дальнейшим ростом силы связи ($U/2D = 1.6$) $H_{c2}(T)$ становится практически линейной и учет локализационных поправок оказывается несущественным во всей температурной области. Таким образом, в БЭК-пределе очень сильной связи влияние андерсоновской локализации на поведение верхнего критического поля сильно ослаблено. В фазе андерсоновского диэлектрика (рис. 4б) в БКШ-пределе слабой связи ($U/2D = 0.2$) учет эффектов андерсоновской локализации приводит к существенному росту $H_{c2}(T)$ (см. вставку на рис. 4б). Увеличение силы связи приводит к росту верхнего критического поля во всей температурной области. При промежуточной силе связи ($U/2D = 0.6, 1.0$) учет эффектов андерсоновской локализации заметно увеличивает H_{c2} во всей температурной области.

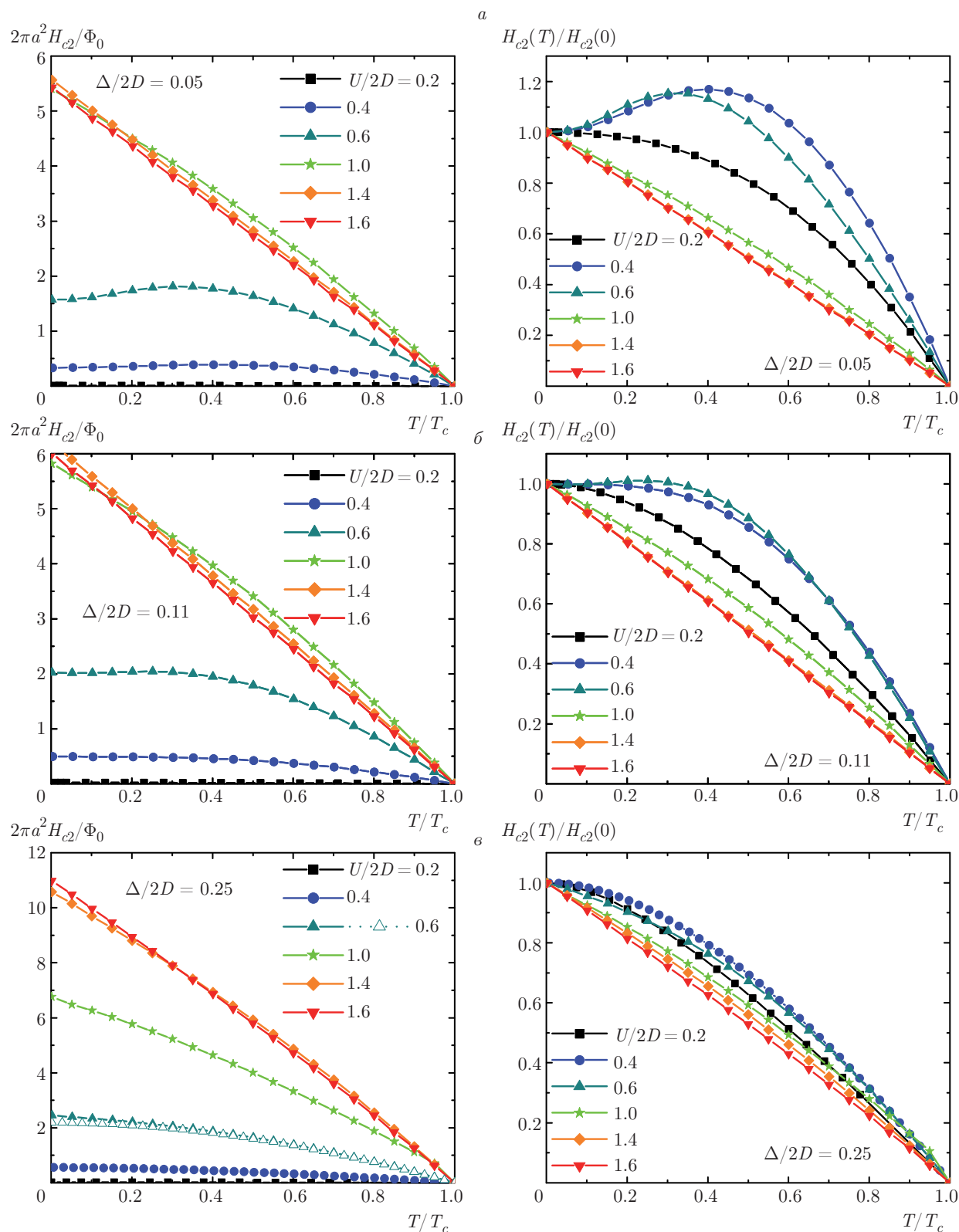


Рис. 3. Температурная зависимость верхнего критического поля при различной силе связи для разных значений степени беспорядка. На рисунках слева верхнее критическое поле нормировано на $\Phi_0/2\pi a^2$, справа — верхнее критическое поле нормировано на свое значение при $T = 0$

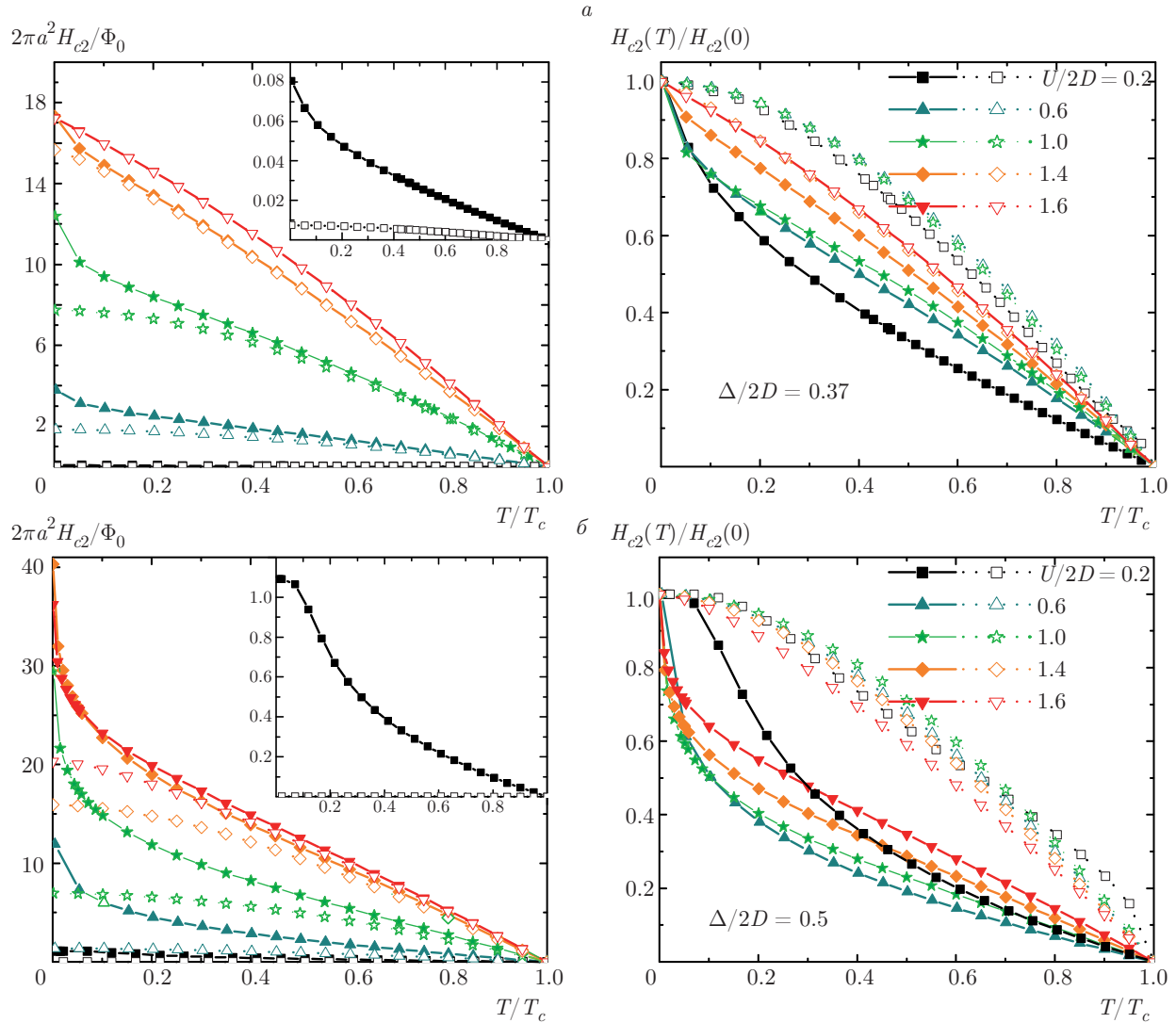


Рис. 4. Температурная зависимость верхнего критического поля на андерсоновском переходе металл–диэлектрик (а) и в фазе андерсоновского диэлектрика (б) при различных значениях силы связи. На рисунках слева H_{c2} нормировано на $\Phi_0/2\pi a^2$, справа — верхнее критическое поле нормировано на свое значение при $T = 0$

Однако наибольшее увеличение наблюдается в области низких температур, что приводит к положительной кривизне кривой $H_{c2}(T)$ и очень резкому росту $H_{c2}(T = 0)$. В БЭК-пределе очень сильной связи ($U/2D = 1.4, 1.6$) верхнее критическое поле практически перестает расти с ростом силы связи. Вклад от эффектов андерсоновской локализации при $T \sim T_c$ оказывается несущественным и зависимость $H_{c2}(T)$ становится практически линейной. Однако в низкотемпературной области ($T \ll T_c$) вклад от андерсоновской локализации по-прежнему существенно увеличивает верхнее критическое поле и кривая $H_{c2}(T)$ имеет положительную кривизну в этой об-

ласти. Таким образом, и в фазе андерсоновского диэлектрика в БЭК-пределе очень сильной связи влияние андерсоновской локализации на поведение верхнего критического поля заметно подавляется, однако в низкотемпературной области оно все же остается весьма существенным, заметно изменяя величину $H_{c2}(T = 0)$.

На рис. 5 приведены температурные зависимости верхнего критического поля для различных степеней беспорядка в трех интересующих нас областях силы связи: в БКШ-пределе слабой связи ($U/2D = 0.2$), в области кроссовера БКШ–БЭК (промежуточная связь $U/2D = 1.0$), в БЭК-пределе

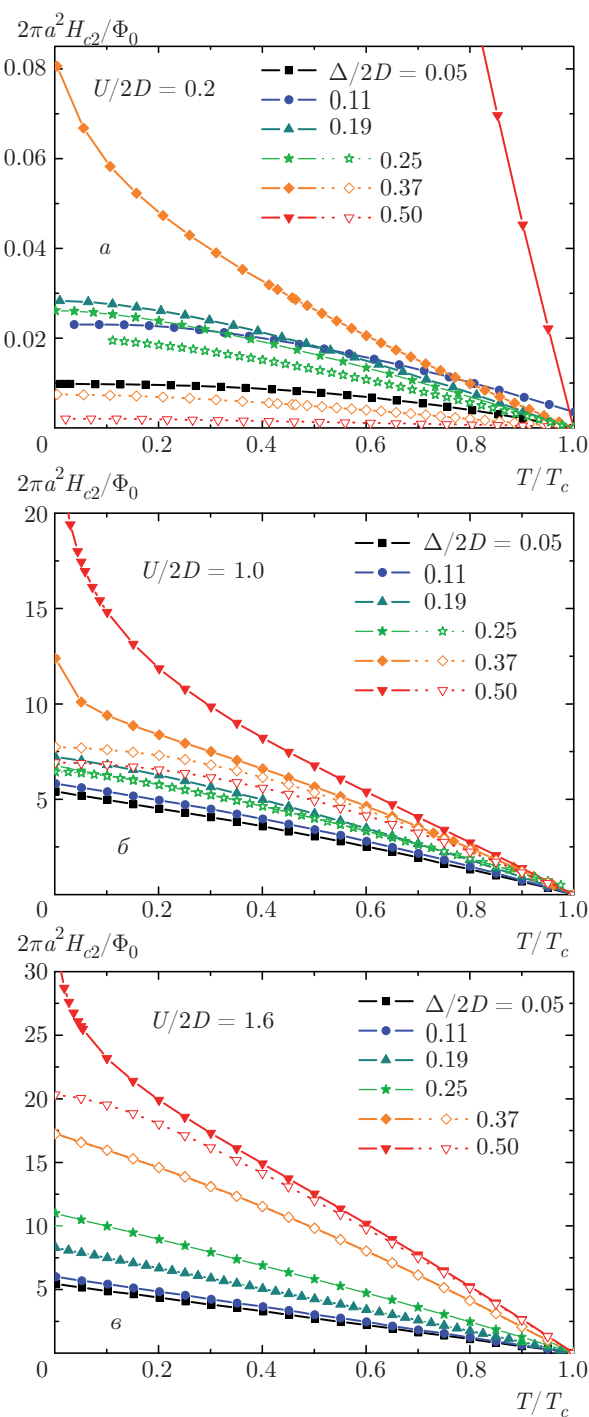


Рис. 5. Температурная зависимость верхнего критического поля для различных степеней беспорядка: *a* — БКШ-предел слабой связи; *б* — область кроссовера БКШ–БЭК с промежуточной связью; *в* — БЭК-предел сильной связи. Темные символы и сплошные линии соответствуют расчетам с учетом локализационных поправок. Светлые символы и пунктирные линии соответствуют лестничному приближению по примесям

сильной связи ($U/2D = 1.6$). В пределе слабой связи (рис. 5*a*) рост беспорядка приводит к росту верхнего критического поля во всей области температур в пределе слабого беспорядка ($\Delta/2D < 0.19$), при этом кривые температурной зависимости имеют отрицательную кривизну и по форме близки к стандартной зависимости WHH [11]. С дальнейшим ростом беспорядка без учета локализационных поправок верхнее критическое поле во всей температурной области начинает уменьшаться. Однако учет локализационных поправок в пределе слабой связи в области сильного беспорядка ($\Delta/2D \geq 0.37$) существенно увеличивает верхнее критическое поле и качественно изменяет его температурное поведение. Кривые $H_{c2}(T)$ приобретают положительную кривизну. Верхнее критическое поле быстро растет с ростом беспорядка во всей температурной области. При промежуточной связи (рис. 5*б*) в пределе слабого беспорядка температурная зависимость верхнего критического поля становится практически линейной. Верхнее критическое поле во всей температурной области растет с ростом беспорядка. В пределе сильного беспорядка ($\Delta/2D \geq 0.37$) локализационные поправки, как и в пределе слабой связи, увеличивают верхнее критическое поле во всей температурной области. Кривые $H_{c2}(T)$ приобретают положительную кривизну. Однако в области промежуточной связи влияние эффектов от андерсоновской локализации существенно слабее, чем в пределе слабой связи, и является существенным лишь в низкотемпературной области. В БЭК-пределе сильной связи (рис. 5*в*) в области слабого беспорядка кривые $H_{c2}(T)$ являются фактически линейными. Верхнее критическое поле растет с ростом беспорядка во всей температурной области. В пределе сильного беспорядка непосредственно на самом переходе Андерсона ($\Delta/2D = 0.37$) кривая $H_{c2}(T)$ по-прежнему остается линейной и учет локализационных поправок фактически не изменяет температурную зависимость верхнего критического поля. Дальнейшее увеличение беспорядка приводит к росту $H_{c2}(T)$. Глубоко в фазе андерсоновского диэлектрика ($\Delta/2D = 0.5$) кривая $H_{c2}(T)$ приобретает положительную кривизну, и учет эффектов андерсоновской локализации увеличивает $H_{c2}(T)$ в низкотемпературной области, в то время как вблизи T_c локализационные поправки оказываются несущественными даже при таком сильном беспорядке. Таким образом, сильная связь существенно ослабляет влияние эффектов локализации на температурное поведение верхнего критического поля.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе, в рамках приближения Нозьера–Шмитт-Ринка и DMFT+ Σ -обобщения теории динамического среднего поля мы исследовали влияние разупорядочения, в том числе и сильного (включая область андерсоновской локализации) и роста спаривательного взаимодействия на температурное поведение верхнего критического поля. Расчеты были проведены для широкой области значений потенциала притяжения U , от области слабой связи $U/2D \ll 1$, где неустойчивость нормальной фазы и сверхпроводимость хорошо описываются моделью БКШ, вплоть до предела сильной связи $U/2D \gg 1$, где переход в сверхпроводящее состояние связан с бозе-конденсацией компактных куперовских пар, образующихся при температуре существенно выше температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

Рост силы связи U приводит к быстрому возрастанию $H_{c2}(T)$, особенно в низкотемпературной области. В пределе БЭК и в области кроссовера БКШ–БЭК кривая $H_{c2}(T)$ становится практически линейной. Разупорядочение при любой силе связи также приводит к росту $H_{c2}(T)$. В БКШ-пределе слабой связи с усилением беспорядка растет как наклон кривой верхнего критического поля вблизи $T = T_c$, так и $H_{c2}(T)$ в низкотемпературной области. В пределе сильного беспорядка, в окрестности перехода Андерсона, локализационные поправки приводят к дополнительному резкому увеличению верхнего критического поля в низкотемпературной области и кривая $H_{c2}(T)$ становится вогнутой, т. е. приобретает положительную кривизну. В области кроссовера БКШ–БЭК и в пределе БЭК слабый беспорядок несущественно влияет на наклон верхнего критического поля в T_c , однако сильный беспорядок в окрестности перехода Андерсона приводит к заметному увеличению наклона верхнего критического поля с ростом беспорядка. В низкотемпературной области $H_{c2}(T)$ существенно растет с увеличением беспорядка, особенно в окрестности перехода Андерсона, где за счет локализационных поправок заметно увеличивается $H_{c2}(T = 0)$ и кривая $H_{c2}(T)$ вместо линейной зависимости, характерной в пределе сильной связи при слабом беспорядке, становится вогнутой.

В рассмотренной модели значения верхнего критического поля при низких температурах могут достигать экстремальных значений, существенно превышающих $\Phi_0/2\pi a^2$. Это делает актуальным дальнейший анализ модели с учетом парамагнитного

эффекта и неизбежной роли эффектов квантования электронного спектра в магнитном поле. Можно надеяться, что эффекты квантования спектра несущественны в области сильного беспорядка, а парамагнитный эффект существенно ослабляется в области сильной и очень сильной связи. Эти вопросы требуют отдельного рассмотрения.

Работа выполнена в рамках темы государственного задания (ФАНО) № 0389-2014-0001 и при частичной поддержке РФФИ (грант № 17-02-00015) и в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости».

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **36**, 319 (1958) [Sov. Phys. JETP **9**, 220 (1959)].
2. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **35**, 1158 (1958) [Sov. Phys. JETP **9**, 1090 (1959)].
3. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **36**, 1918 (1959) [Sov. Phys. JETP **36**, 1364 (1959)].
4. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **39**, 1781 (1960) [Sov. Phys. JETP **12**, 1243 (1961)].
5. P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959).
6. P. G. De Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, W. A. Benjamin, NY (1966).
7. Л. Н. Булаевский, М. В. Садовский, Письма в ЖЭТФ **39**, 524 (1984) [JETP Letters **39**, 640 (1984)].
8. L. N. Bulaevskii and M. V. Sadovskii, J. Low. Temp. Phys. **59**, 89 (1985).
9. M. V. Sadovskii, Phys. Rep. **282**, 226 (1997); arXiv: cond-mat/9308018.
10. M. V. Sadovskii, *Superconductivity and Localization*, World Sci., Singapore (2000).
11. N. R. Werthamer and E. Helfand, Phys. Rev. **147**, 288 (1966); N. R. Werthamer, E. Helfand, and P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **147**, 295 (1966).
12. P. Nozieres and S. Schmitt-Rink, J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985).
13. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995).
14. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

15. D. Vollhardt, in: *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, ed. by A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings Vol. 1297, AIP, Melville, New York (2010), p. 339; arXiv:1004.5069.
16. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 217 (2005) [*JETP Lett.* **82**, 198 (2005)]; arXiv:cond-mat/0506215.
17. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **72**, 155105 (2005); arXiv:cond-mat/0508585.
18. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *ФНТ* **32**, 528 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 398 (2006)]; arXiv:cond-mat/0510376.
19. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, *УФН* **182**, 345 (2012) [*Physics Uspekhi* **53**, 325 (2012)]; arXiv:1109.2305.
20. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **133**, 670 (2008) [*JETP* **106**, 581 (2008)]; arXiv:0706.2618.
21. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **149**, 589 (2016) [*JETP* **122**, 509 (2016)]; arXiv:1507.07654.
22. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Phys. Rev. B* **75**, 115102 (2007); arXiv:cond-mat/0609404.
23. N. A. Kuleeva, E. Z. Kuchinskii, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **146**, 304 (2014) [*JETP* **119**, 264 (2014)]; arXiv:1401.2295.
24. E. Z. Kuchinskii, N. A. Kuleeva, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 213 (2014) [*JETP Lett.* **100**, 192 (2014)]; arXiv:1406.5603.
25. E. Z. Kuchinskii, N. A. Kuleeva, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **147**, 1220 (2015) [*JETP* **120**, 1055 (2015)]; arXiv:1411.1547.
26. E. Z. Kuchinskii, N. A. Kuleeva, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **149**, 430 (2016) [*JETP* **122**, 375 (2016)]; arXiv:1507.07649.
27. E. Z. Kuchinskii, N. A. Kuleeva, and M. V. Sadovskii, *ФНТ* **43**, 22 (2017) [*Low Temp. Phys.* **42**, 17 (2017)]; arXiv:1606.05125.
28. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, М. В. Садовский, *ЖЭТФ* **152**, 133 (2017) [*JETP* **125**, 111 (2017)]; arXiv:1702.05247.
29. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1963) [A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*, Pergamon Press, Oxford, 1965].
30. М. В. Садовский, *Диаграмматика*, Москва–Ижевск (2010); M. V. Sadovskii, *Diagrammatics*, World Sci., Singapore (2006).
31. R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 395 (2008).
32. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, Часть 2, Гл. 5, Наука, Москва (1978) [E. M. Lifshits and L. P. Pitaevskii, *Statistical Physics, Part 2*, Ch. 5, Pergamon Press, Oxford (1980)].
33. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, *СФХТ* **4**, 2278 (1991) [*Superconductivity: Physics, Chemistry, Technology* **4**, 2278 (1991)].
34. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, *Physica C* **185–189**, 1477 (1991).
35. D. Vollhardt and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **22**, 4666 (1980); *Phys. Rev. Lett.* **48**, 699 (1982).
36. P. Wölfle and D. Vollhardt, in *Anderson Localization*, ed. by Y. Nagaoka and H. Fukuyama, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 39, Springer-Verlag, Berlin (1982), p. 26.
37. А. В. Мясников, М. В. Садовский, *ФТТ* **24**, 3569 (1982) [*Sov. Phys.-Solid State* **24**, 2033 (1982)].
38. Е. А. Котов и М. В. Садовский, *Z. Phys. B* **51**, 17 (1983).
39. M. V. Sadovskii, in *Soviet Scientific Reviews — Physics Reviews*, ed. by I. M. Khalatnikov, Vol. 7, Harwood Academic Publ., NY (1986), p. 1.
40. D. Vollhardt and P. Wölfle, in *Electronic Phase Transitions*, ed. by W. Hanke and Yu. V. Kopayev, Vol. 32, North-Holland, Amsterdam (1992), p. 1.